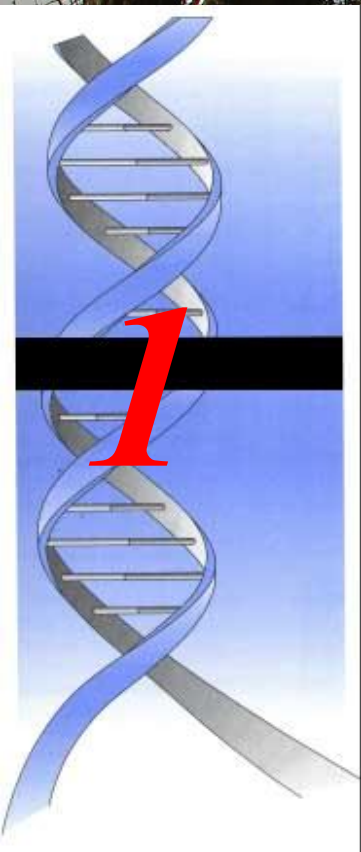


化学化工信息



主讲

王荣民

甘肃省高分子材料重点实验室

第1章 化学信息及网络基础知识

1.1 化学信息

当今时代是一个信息时代，信息对于经济和社会的发展、科技文化的进步都起着重要的作用。在这个信息时代中，谁掌握了最新信息，谁就掌握了主动性。信息是日常生活中常见的现象，知识、情报和文献首先应当属于信息的范畴。

1.1.1 化学信息基本概念

信息(Information)的二要素

信即信号，息即消息，信息就是通过信号带来的消息

差异

传递

信息

知识(Knowledge)

知识是人脑对**信息**进行思维加工而形成的对客观世界物质形态和运动规律的认识

文献(Document)

文献是记录**有用知识**的一种载体，具有存贮和传递知识功能的一切载体都称为文献

情报(Information, Intelligence)

情报是**被传递的知识**

1.1.1 化学信息基本概念

信息 (Information) : 信即信号, 息即消息, 信息就是通过信号带来的消息

知识 (Knowledge) :

文献 (Document) :

情报 (Information, Intelligence) :

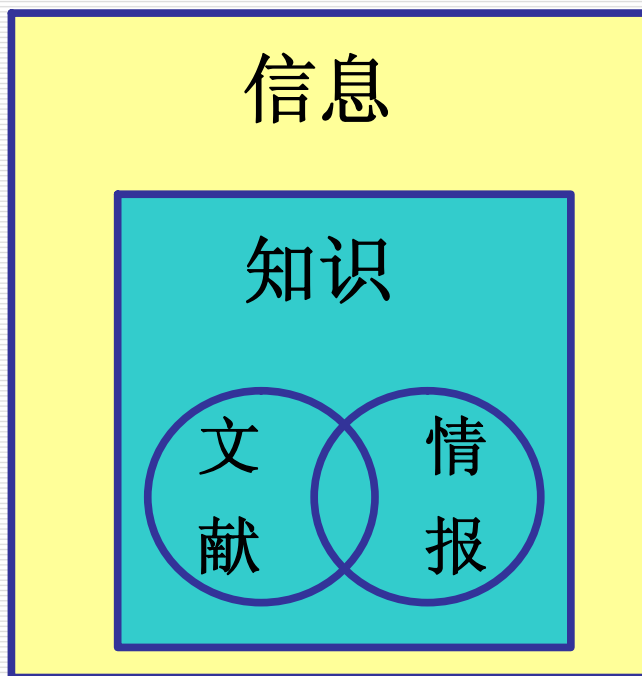
信息的二要素

差异

传递

随着信息技术的飞速发展, 电子出版物大量涌现, 使文献、情报、信息这三者之间趋向统一, 逐渐淡化了三者概念上的差别, 尤其在与国际交往中情报与信息是同一概念, 所以目前国内科技界已倾向于用“信息”一词替代“情报”、“文献”。

信息、知识、情报和文献间的关系



近年来，随着信息技术的飞速发展，电子出版物的大量涌现，使文献、情报、信息这三者之间趋向统一。目前在国内科技界已倾向于用“信息”一词代替情报、文献。

1.1.2、化学信息与化学文献

狭义上看，化学信息即化学文献，是科技信息的重要组成部分。

广义上看，还包括相关领域的商务信息、远程教学、会议与交流、其他信息等等。

化学信息学的内容包括：

- (1) 化学、化工文献学
- (2) 化学知识体系的计算机表示、管理与网络传输
- (3) 化学图形学
- (4) 化学信息的解析与处理
- (5) 化学知识的计算机推演
- (6) 化学教育与教学的现代技术与远程信息资源。

信息的传递主要靠口授、传抄或通讯联系来进行。17世纪末科学协会相继成立，开始创办科技期刊，1665年创刊的（英国皇家学会哲学汇刊）是世界上最早出版的科技期刊。1778年出版了第一种化学期刊Crell's Chemisches Journal。17世纪后半期和18世纪出现了专利文献。到20世纪60年代，科学技术高速发展，科技文献急剧增加。其中化学文献的数量后递增长速度在各门学科中始终占据着领先的地位。

Internet 给我们(化学工作者)来了什么?

- 检索和收集化学文献——方便快捷
- 获取化学信息——成本大幅度降低
- 稿件投递--速度加快

- 与发达国际与地区--差距缩短
- 高起点的物质基础

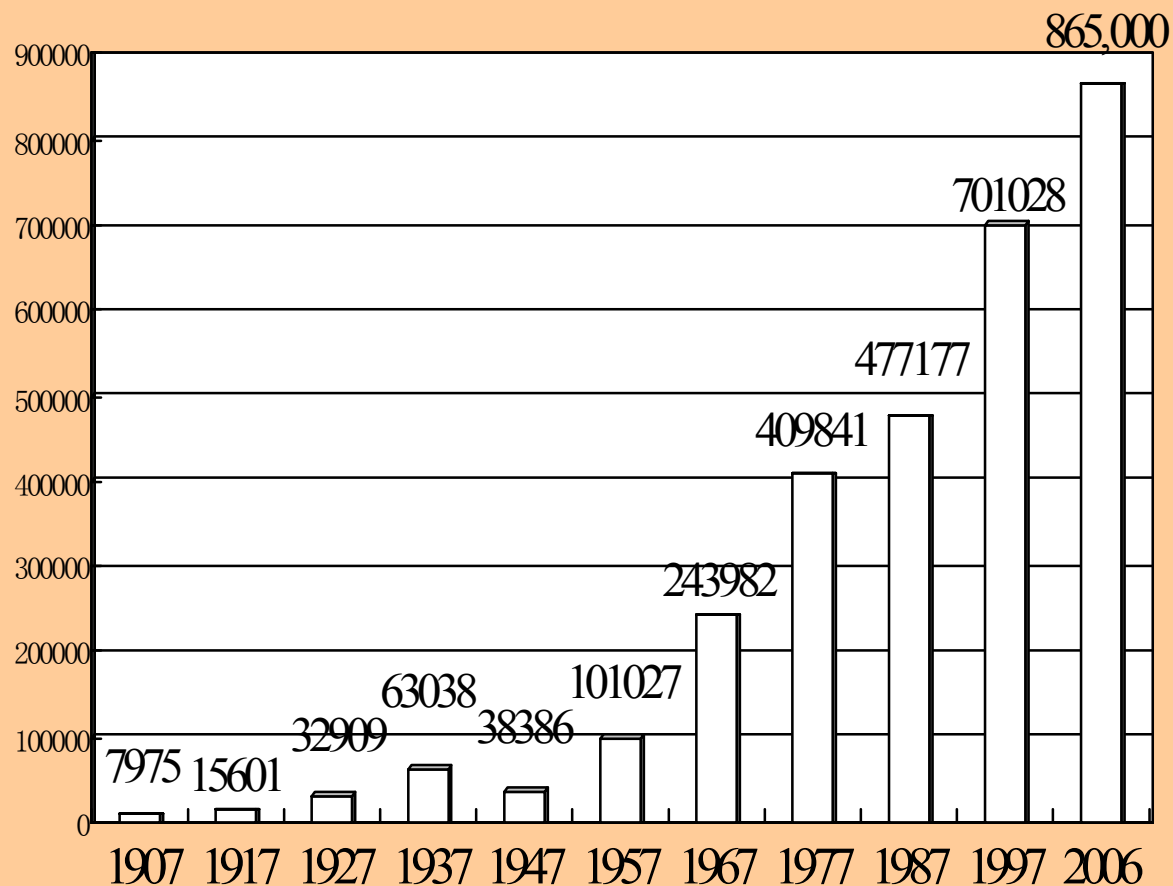
1.1.3、Internet与化学信息

- Internet是当今世界上最大的信息传播媒介，它通过计算机把世界的各个单位与个人联系在一起，把学习者、教育者、研究人员联系在一起，共享各种信息资源，被称为信息高速公路。
- Internet信息资源极其丰富，随着图书情报、出版界进入网络化、电子图书馆虚拟化的时代，化学信息的数量日趋增加，形式也呈现多样化。
- Internet极大地影响着化学信息的检索与交流。在线文献检索、在线数据库检索、在线交流、远程学习和远程计算都已经成为现实。因此，在信息时代，对化学文献、化学数据仅仅以传统的方式处理和传递不再适应实际的需要了，必须学习运用计算机处理化学信息，通过互联网传递化学信息。
- Internet上的化学资源具有数量大，更新快等特点，通过Internet检索各类化学资源已经成为一种十分重要的手段。

但是，网络化学资源发展并不完善，有些信息源费用较高。因此，不能忽视传统的化学信息资源与检索方法。

1.1.4、当代化学文献信息的特点

- (一) 数量庞大，增长迅速。
- (二) 种类繁多
- (三) 语种扩大，译文增多
- (四) 内容重复交叉、分布分散
- (五) 内容的新陈代谢、自然淘汰速度较快



1.2 化学化工信息的分类

一、按加工层次分类

零次文献	形成一次文献之前的文献。如原始实验数据、手稿等。零次文献是非常重要的文献，一般都是保密级的。
一次文献	即原始文献，凡是以作者本人的研究成果为依据写作的，未经情报加工的论文称为一次文献。一般的期刊论文、研究报告、学位论文、会议资料及专利说明书都是一次文献。一次文献是文献的主体，是最基本的情报源，是文献检索最终查找的对象。
二次文献	即所谓检索工具，是指将一次文献，即分散的、无组织的、原始资料经过加工整理，介绍文献特征，摘取内容要点，成为系统的文献，以便读者查找与利用，如书目、索引、文摘等。可以作为一次文献的线索。
三次文献	是指通过二次文献，选用一次文献内容而编写出来的成果。如专题评述、动态综述、进展报告、数据手册、百科全书等。三次文献一般附有大量参考文献，也是查找一次文献的重要途径。

二、按出版形式分类

科技图书	科技图书 (Books) 是对已发表的科研成果、生产技术或经验, 或者某一知识领域系统地论述或概括。
期 刊	期刊 (Periodicals) 又可称为杂志 (Journal或Magazine)。一般是指具有固定题名、定期或不定期出版的连续出版物。
科技报告	科技报告 (Reports) 是关于某项研究成果的正式报告, 或者是对研究过程中每个阶段进展情况的实际记录。
专利文献	专利文献 (Patents), 主要指专利说明书。它是专利申请人向政府递送的说明新发明创造的书面文件。
学位论文	学位论文是指作者为取得专业资格的学位而撰写的介绍自己研究结果的文献。学位论文在美国称为“Dissertation”(Diss.), 在英国称为“Thesis”。
会议文献	会议文献 (Proceedings) 也称会议资料, 有学术会议的报告、记录、论文集及其他文献, 包含了大量的一次文献。
标准文献	标准文献 (Standards) 是指技术标准、技术规范和技术法规等。
技术档案	技术档案 (Technical Depositeds) 是指具体工程建设及科学技术部门在技术活动中形成的技术文件、图纸、图片、原始技术记录等资料。
政府出版物	政府出版物 (Government Publications) 是各国政府部门及其所属的专门机构发表、出版的文件。
产品资料	产品资料通常指产品样本、产品目录 (Catalogs), 产品说明书是对定型产品的性能、构造原理、用途、使用方法和操作规程、产品规格等所作的具体说明。
数 据 库	数据库 (Database) 是以网络为基础的信息源, 除包括上述十大情报源以外, 还有化学物质的结构、图谱、性质等信息。

Internet与化学信息

- 科技图书
- 期刊
- 科技报告
- 专利文献
- 学位论文
- 会议文献
- 标准文献
- 技术档案
- 政府出版物
- 产品资料

- 数据库
- 教育、科普信息
- 会议、讨论等信息
- 仪器、试剂商业信息
- 政府、科研、教育机构与组织

三、按载体分类

印刷型	包括铅印、油印、胶印等，有书本式、卡片式。
缩微型	是以感光材料为存储介质，以缩微照相为记录手段的文献形式。主要包括缩微胶卷等高倍率的复制文献。
声像型	运用录音、录像的技术，给人一直观的感觉，主要包括唱片、录音带、录像带、电影片、幻灯片，多媒体光盘VCD等。
机读型	现在的许多文献资料，已经由数字磁盘存储转向采用数字光盘的存储方式（CD-ROM光盘），由于CD-ROM光盘存储量大（每片650兆字节），寿命长（达100年），携带方便，因此许多大型文献库都采用此方式存储。
网络信息	有国际网络、局域网。信息量大，周期短，用户可以得到几分钟甚至几秒钟以前产生的所有信息，而且节省纸张和投递费用。电子出版物，其中一小部分是一种通过网络系统向入网的用户发行的一种刊物。这种方式发行的刊物，如《化学通报》就有网络版，内容与印刷版不同。通过Internet网络可以阅读。

1.3 化学化工信息的检索与利用

一、信息检索工作的目的和意义

二、文献检索的基本原理

文献检索的基本原理就是利用检索标识与文献的存储标识相比，如果能够取得一致，就叫“匹配”，就可得到“命中文献”。图2提示了文献检索、检索工具、文献检索系统的一般构成。

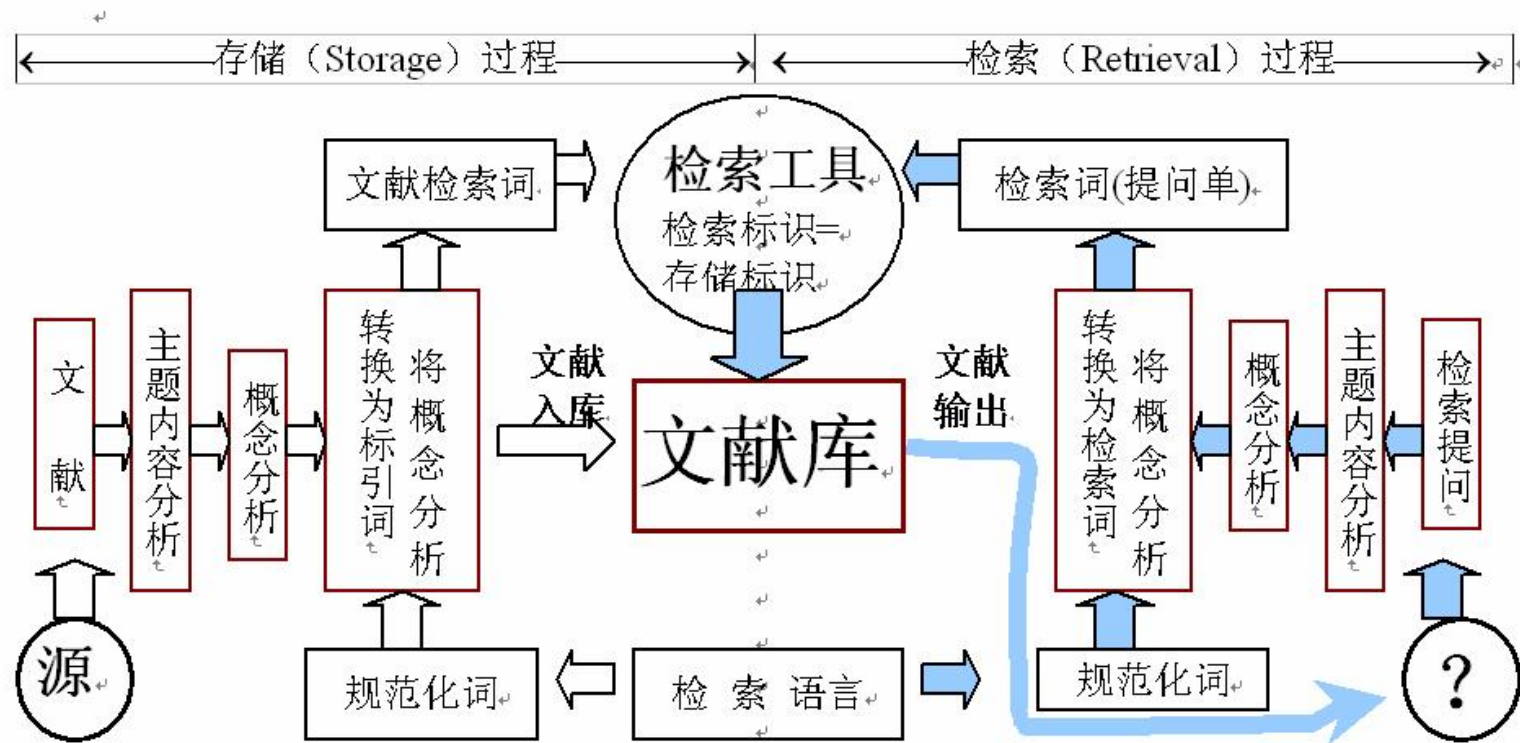


图2 文献检索系统模型图

三、化学信息的检索途径

(一) 按检索设备

- (1) **手工检索** 即传统的利用卡片式或书本式的目录、文摘等检索工具检索情报。
- (2) **计算机检索** 将存贮有大量文献信息的数据库软盘、磁带、磁盘机和光盘，通过计算机的检索软件系统进行检索。计算机网络检索正在普及。
- (3) **缩微文献检索** 即把缩微胶卷或缩微平片作为情报存贮的载体，使用相应的光学阅读装置或电子技术设备进行检索。

(二) 按文献外表特征的检索途径 该途径在网络信息中查阅十分便捷。

- (1) **文献名称途径** 从书名、刊名、篇名着手，从文献名称可以查到文献。
- (2) **作者姓名途径** 可以从作者目录，或作者索引查寻。 **特点； 缺点：**
- (3) **文献序号途径**

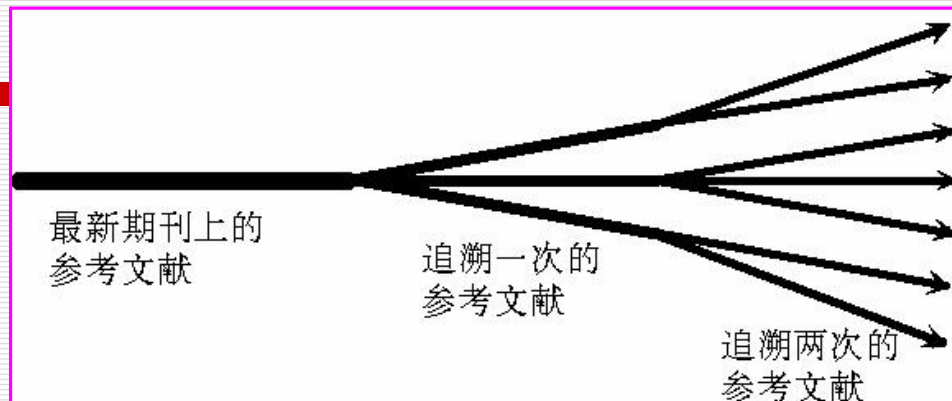
(三) 从文献内容特征的查阅途径

- (1) **分类途径** 。能把同一学科的文獻信息集中在一起检索出来，缺点是边缘、前沿学科在分类时往往难于处理，查找不便。
- (2) **主题、关键词途径**
- (3) **分子式途径** 按化合物分子符号排列。对于具体的化合物检索速度较快。

四、化学信息检索方法

(一) 直检法 即直接检索法，它是从浏览查阅原始文献中直接获取所需文献的方法。

(二) 引文法 又叫追溯法。利用文献末尾所附的“参考文献”进行追溯查找。在没有成套检索工具，或检索工具很不齐全的条件下，用此方法，可以查得一批有关文献。缺点是：原文引用的参考文献是很有限的，不可能列出全部有用文献。而且有的文献参考价值不大。



(三) 工具法 又称常用法，是查找文献的主要方法。它又可细分为：

(1) 顺查法。(2) 倒查法。(3) 抽查法。

(四) 循环法 又称分段法或交替法，这种检索方法，实际上是以上几种方法相互交替的使用过程。先用检索工具查出一批文献，然后利用这些文献内所附的参考引用文献追溯查找，扩大线索。或者先掌握一篇文献后的参考引用文献线索，从中发现这些文献所具备的检索途径，如作者、序号、分类、主题等，然后利用相应的检索工具扩大线索获取文献。

各种检索方法各有优缺点，采用什么检索方法，要看检索条件和要求而定。检索的基本要求是：“广、快、精、准”。但是，由于各种课题的检索目的不同，要求也不完全相同。例如：预收集课题的系统性文献，可以采用顺查法，用检索工具进行检索。如果是要解决某一课题有关的关键性技术问题，要求既快又准地提供关键性情报，解决急需，时间又比较紧迫，这种情况下，宜用倒查法，迅速查得最新技术文献。

五、化学信息检索步骤

文献检索过程包括：

- (1) 分析研究课题 明确检索范围及要求。
- (2) 选择检索系统 选择检索工具、确定检索标识。
- (3) 确定检索途径和检索方法。
- (4) 查找文献线索。
- (5) 查找和获取原始文献

六、文献的搜集与积累

各类文献的产生和流通渠道不同，搜集方法也就不同：

- (1) **选购** 有预订、现购和邮购等几种方法。
- (2) **索取与交流** 指根据线索从文献所有者那里免费取得文献的方法，可以通过索取或建立文献交流关系来实现。
- (3) **现场搜集** 指搜集者在各种活动场所就地搜集文献资料的方法。
- (4) **委托搜集** 对于一些既采购不到，又难以用其他途径获得的文献资料，可通过委托他人或有关单位承办获得。
- (5) **复制** 文献资料的复制是一种快速、准确，而且方便地获取文献资料的方法。复制方式主要有静电复制、缩微复制及照相复制等。
- (6) **计算机的联机订购** 一些国内没有的文献资料，可以通过国际联机检索终端向国外联机中心购原文复制件或订购复制缩微件。

搜集来的文献资料，来源不一，类型各异，内容十分分散，欲以利用，还需进一步有效地积累，将其转换成便于存贮与利用的记录形式。文献资料的记录形式，按其内容加工层次划分有索引式、摘录式、提要式、心得式、全录式。按其所使用的记录载体划分有稿纸式、笔记式、卡片式、活页式、剪报式；此外，还有复印式、磁带式、缩微式、网络下载等现代记录形式，它们具有方便、迅速、规范的特点。

1.4 查阅化学文献注意事项

一、记录要完全

文献著录格式：

作者姓名（通讯地址）、题目名称、期刊名称、年份、卷（期）、起止页码、文摘的杂志卷号、页码（或文摘号）、内容摘要。

例1：尤长城，张雯，刘育（南开大学化学系），“超分子体系中的分子识别研究”，化学学报，2000，58（3），253-257（《全国报刊索引》自然科学技术版：010101290）。

例2：Charlwood, Joanne; Birreil, Helen; Gribble, Andy; Burdes, Vincent; Toison, David; Camilleri, Patrick(New Frontiers Science Park, SmithKline Beecham Pharmaceuticals, Hariow Essex, UK CMI9 5AW). “A Probe for the Versatile Analysis and Characterization of N-Linked Oligosaccharides”. Anal. Chem. 2000, 72(7), 1453-1461(CA: 133:308569h).

1.4 查阅化学文献注意事项

二、充分利用现有条件

尽量利用各种有利条件，从最简单途径着手检索。如已知化合物

分子式，已知**专利号**，已知某个**作者**。具体项目，针对性的问题，可从主题索引、关键词索引去查。

广泛性、系统性的问题，可从分类体系中查。了解**最新的文献动向**，可从近期文摘刊物的分类目次中选择适用的范畴，进行一般性的浏览，吸收印象。

根据检索条件确定检索方法。**没有检索工具时**，采用追溯法较实际。虽然它效率不高，费时费力，但也比逐本、逐期、逐年翻查原始文献要快得多。但是在**有成套检索工具**可供利用的情况下，采用工具法为佳。它的检出率和检准率都比追溯法高，是最常用的检索方法。

三、交叉补充

除了利用检索工具开展检索过程之外，还要利用各种现期刊物补充查找。检索工具收录的文献也有一定的限制，尤其是一些不公开发表的文献。

四、原文转换

五、阅读时重点突出

1.5 计算机网络基础知识

网络分类 (缩写)	处理机所在 区域(分布大 约距离)	应用、特点
局域网(LAN)	房间(10 m) 建筑物(100 m) 校园(1 km)	一方面,它易管理与配置;另一方面,容易构成简洁整齐的拓扑结构。局域网速率高、成本低、应用广、组网方便及使用灵活等特点,是目前计算机网络技术发展中最活跃的一个分支。
城域网(MAN)	城市(10 km)	城域网是介于局域网与广域网之间的一种大范围的高速网络。
广域网(WAN)	国家(100 km)	广域网一般跨城市、地区甚至国家。此类网络出于军事、国防和科学研究的需要,发展较早。其速率要比局域网低得多。许多全国性的计算机网络就属于这类网络,例如中国邮电部的ChinaNet网,中国教育网等。
互联网 (INTERNET)	洲或洲际 (1000 km)	它是将不同的物理网络技术按某种协议统一起来的一种高层技术。

nwnu.edu.cn

国际一级域名				中国二级域名	
大型机构最高域名		国际/地区最高域			
域名	含义	域名	含义	域名	含义
com	商业组织	cn	中国	ac	科研
edu	教育机构	de	德国	com	商业
int	国际性组织	fr	法国	edu	教育
mil	军队	hk	香港	mil	军队
gov	政府部门	jp	日本	gov	政府
net	网络技术组织	sg	新加坡	net	电信网
org	非盈利性组织	tw	台湾地区	org	团体
		uk	英国		

1.5 免费邮箱申请及数据传输方法

一、免费电子邮箱（Email）申请

首先进入大型网站：如网易<http://www.163.com>

二、免费电子邮箱的用途

- 传输数据；
- 存储数据--网盘，www.56.com
- 由于大型网站的安全设置较高，所以，通过电子邮箱传输数据要比直接拷贝数据安全，可降低计算机病毒传播的概率。